

УДК 004.67

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ВЕКТОРНОГО АЛГОРИТМА ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК

¹Широканев А. С., ^{1,2}Кирш Д. В., ^{1,2}Куприянов А. В.

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королёва, г. Самара

²Институт систем обработки изображений Российской академии наук, г. Самара

В современное время кристаллические структуры используются во многих областях. Тем не менее, вещества с кристаллической структурой являются недостаточно исследованными. К примеру, жидкие кристаллы постепенно внедряются в оптические устройства, однако из-за отсутствия требуемых знаний о жидких кристаллах многие задуманные оптические приборы остаются нереализованными.

Оценивание параметров элементарной ячейки – это основная задача анализа кристаллических наноструктур. Наиболее точное определение параметров позволяет получить больше знаний о кристалле. Поэтому разрабатываются более точные методы и алгоритмы определения параметров ячейки.

Для решения задачи параметрической идентификации удобно использовать элементарную ячейку Браве [1]. Прочие элементарные ячейки в определённых задачах заменяют ячейку Браве в основном вследствие наличия у решётки Браве проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки, которая отсутствует в остальных моделях. Разработанный в предыдущих исследованиях алгоритм [2], оптимизирующий векторы трансляции элементарной ячейки Браве, позволяет достичь высокой точности по сравнению с алгоритмами, оценивающими параметры элементарных ячеек, например, таких как метод на основе оценивания параметров ячейки Браве [3] и метод на основе оценивания параметров ячейки Вигнера-Зейтца [3]. Однако разработанный алгоритм обладает вычислительной сложностью, зависящей от количества итераций. При высоком числе итераций алгоритм выполняется существенно медленнее, чем существующие алгоритмы. Вследствие данного недостатка предложен векторный алгоритм, основанный на оптимизации векторов трансляции градиентным методом с постоянным шагом. Для реализации векторного алгоритма использовалась технология CUDA.

Алгоритм на основе оптимизации векторов трансляции элементарной ячейки Браве

Идея алгоритма [2] заключается в оптимизации целевой функции (1) векторами трансляции $\bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3$. Для введённых обозначений $\bar{n}_i = (i_l \ j_l \ k_l)^T$ и $P = (\bar{p}_1 \ \bar{p}_2 \ \bar{p}_3)$ градиент записывается в виде (2).

$$E = \sum_{l=1}^L \min_{i,j,k} \|\bar{x}_l - (i\bar{p}_1 + j\bar{p}_2 + k\bar{p}_3)\|^2. (1)$$

$$\nabla E(P) = 2 \left[\sum_{l=1}^L (P\bar{n}_l - \bar{x}_l) \bar{n}_l^T \right]. (2)$$

Итерационный процесс представляет собой форму $P^{n+1} = P^n - \lambda \nabla E(P^n)$.

Векторный алгоритм параметрической идентификации кристаллической решётки на основе градиентного метода с постоянным шагом.

Каждая задача оперирует с отдельным узлом кристаллической структуры и представляет последовательность следующих действий: вычисление вектора индексов

\bar{n}_i ближайшего узла к \bar{x}_i ; вычисление элемента $\nabla E_i(P) = (P\bar{n}_i - \bar{x}_i)\bar{n}_i^T$. После параллельного выполнения всех задач требуется вычислить итоговый результат, то есть выполнить операцию редукции

$$\nabla E(P) = 2 \left[\sum_{i=1}^L \nabla E_i(P) \right]$$

Параллельная операция редукции производилась по схеме «Разделяй и властвуй» с устранением конфликтов по банкам при взаимодействии с распределённой памятью.

Проведём исследование зависимости ускорения от размерности задачи. Под размерностью задачи будем понимать количество узлов по одной из осей трёхмерной решётки. Эксперименты проводились на видеокарте GeForce NVidia M840 и процессоре Intel Core i7-4710MQ. Для использованных моделей процессора и видеокарты теоретически возможно достижение десятикратного ускорения GPU относительно CPU.

На рисунке 1 представлены результаты исследования ускорения разработанного векторного алгоритма, основанного на оптимизации векторов трансляции при различных размерностях задачи. Ускорение алгоритма наблюдается лишь при количестве узлов выше 700. Из-за высокой степени свободы решаемой задачи требуется выделять большой объём распределённой памяти на GPU, из-за чего использование разделяемой памяти оказывается недостаточно эффективным.



Рис. 1. Исследование ускорения

При большой размерности было достигнуто почти 5-кратное ускорение относительно последовательного алгоритма, что позволяет существенно сократить время проведения анализа кристаллической структуры. Дальнейший рост ускорения за счёт увеличения размерности задачи на имеющемся аппаратном обеспечении невозможен в связи с жёсткими ограничениями на объём памяти видеокарты, поэтому требуется проведение дополнительной оптимизации разработанного алгоритма. Повышения ускорения можно достичь использованием математических приёмов, заключающихся в уменьшении числа степеней свободы решаемой задачи оптимизации. В будущих исследованиях предполагается разработка векторного алгоритма, который будет использовать распределённую память эффективнее, что обеспечит повышение ускорения.

Библиографический список

1. Шаскольская, М. П. Кристаллография: Учебное пособие для вузов [Текст] / М. П. Шаскольская // М.: Высшая школа, С. 10-14, 1984.
2. Shirokaney, A. S. Development of the crystal lattice parameter identification method based on the gradient steepest descent method [Text] / A. S. Shirokaney, D. V. Kirsh, A. V. Kupriyanov // Computer Science Research Notes. – 2016. – Vol. 2603. – P. 65-68.
3. Куприянов, А. В. Оценка меры схожести кристаллических решеток по координатам их узлов в трехмерном пространстве [Текст] / А. В. Куприянов, Д. В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.